



①9 BUNDESREPUBLIK
DEUTSCHLAND



DEUTSCHES
PATENTAMT

⑩ Offenl gungsschrift
DE 196 32 779 A 1

⑤1 Int. Cl.⁶:
G 01 N 35/00
G 01 N 21/35
G 01 N 21/03

②1 Aktenzeichen: 196 32 779.2
②2 Anmeldetag: 15. 8. 96
④3 Offenlegungstag: 19. 2. 98

DE 196 32 779 A 1

⑦1 Anmelder:
Hoechst AG, 65929 Frankfurt, DE

⑦2 Erfinder:
Windhab, Norbert, Dr., 65795 Hattersheim, DE;
Miculka, Christian, Dr., 65929 Frankfurt, DE; Hoppe,
Hans-Ulrich, Dr., 65929 Frankfurt, DE

⑤4 Verfahren und Vorrichtung zum Untersuchen von chemischen Reaktionen in parallel geschalteten, miniaturisierten Reaktoren

⑤7 Gegenstand der Erfindung ist ein Verfahren zur Untersuchung von chemischen Reaktionen, bei dem man die Reaktionen parallel in Reaktoren durchführt, dadurch gekennzeichnet, daß man die Reaktionen in miniaturisierten Reaktoren durchführt und das Reaktionsgemisch oder die Reaktionsprodukte während der Reaktionszeit analysiert. Gegenstand der Erfindung ist außerdem eine Vorrichtung mit Reaktoren, die mit Zu- und Ableitungen versehen sind, dadurch gekennzeichnet, daß die Reaktoren miniaturisiert sind, bei einem Volumen aus dem Bereich von 0,001 cm³ bis 1 cm³.

Die Vorteile liegen im wesentlichen darin, daß eine Vielzahl von Reaktionen unter praktisch identischen Bedingungen und mit vergleichsweise geringen Substanz- und Probenmengen schnell, kostengünstig und reproduzierbar durchgeführt und dabei gleichzeitig spektroskopisch untersucht werden kann. Sie bietet damit die Möglichkeit, die im Zusammenhang mit der kombinatorischen Chemie diskutierten Möglichkeiten für ein industrielles Katalysatorscreening einzusetzen. Durch die Wahl identischer Proben und unterschiedlicher sonstiger Reaktionsbedingungen kann eine parallele Reaktionsoptimierung durchgeführt werden.

DE 196 32 779 A 1

Die Erfindung betrifft ein Verfahren zur Untersuchung von chemischen Reaktionen, bei dem man die Reaktionen parallel in Reaktoren durchführt. Die Erfindung betrifft weiterhin eine Vorrichtung, insbesondere zur Durchführung dieses Verfahrens, wobei die Vorrichtung mehrere, parallel geschaltete Reaktoren aufweist, die mit Zu- und Ableitungen versehen sind.

Verfahren und Vorrichtungen der genannten Art sind bekannt und werden unter anderem bei der Suche nach Katalysatoren zur heterogenen oder homogenen Katalyse technischer, chemischer Prozesse eingesetzt. In jüngster Zeit ermöglichen es jedoch neue Techniken, Substanzen in hoher Zahl herzustellen, die potentielle Katalysatoren für eine Vielzahl von chemischen Prozessen sein könnten (P. G. Schultz et al, Science 1995, 1738). Die Untersuchung dieser Vielzahl von potentiellen Katalysatoren ist mit den herkömmlichen seriellen Screening-Verfahren kaum mehr möglich, da diese Screening-Verfahren bezüglich Durchsatz und analytischer Auflösung sowie in der Reproduzierbarkeit limitiert sind. Oft werden für reines Aktivitätsscreening völlig unzureichend integrale Effekte wie Erwärmung des Katalysators etc. ohne direkte Produktgemisch- bzw. Effektivitätsanalyse herangezogen. Außerdem stellen die Optimierung der Bedingungen zur Katalysatoraktivierung und Prozeßführung besondere Anforderungen an quantitative, analytische Verfahren und an die Reproduzierbarkeit der Reaktionsbedingungen.

Der Erfindung lag daher die Aufgabe zugrunde, ein kostengünstiges Verfahren oder eine kostengünstige Vorrichtung zu entwickeln, womit man eine Vielzahl von chemischen Reaktionen in kurzer Zeit untersuchen kann und dabei reproduzierbare, qualitative und quantitative Daten bezüglich der Zusammensetzung der unterschiedlichen Reaktionsgemische und Reaktionsprodukte gewinnen kann.

Gelöst wird diese Aufgabe durch ein Verfahren der eingangs genannten Art, das dadurch gekennzeichnet ist, daß man die Reaktionen in miniaturisierten Reaktoren durchführt und das Reaktionsgemisch oder die Reaktionsprodukte während der Reaktionszeit analysiert.

Die Aufgabe wird außerdem durch eine Vorrichtung der genannten Art gelöst, die dadurch gekennzeichnet ist, daß die Reaktoren miniaturisiert sind, bei einem Volumen aus dem Bereich von $0,001 \text{ cm}^3$ bis 1 cm^3 .

Gegenstand der Erfindung ist somit ein Verfahren zur Untersuchung von chemischen Reaktionen, bei dem man die Reaktionen parallel in Reaktoren durchführt, dadurch gekennzeichnet, daß man die Reaktionen in miniaturisierten Reaktoren durchführt und das Reaktionsgemisch oder die Reaktionsprodukte während der Reaktionszeit analysiert.

Gegenstand der Erfindung ist außerdem eine Vorrichtung, insbesondere zur Durchführung dieses Verfahrens, wobei die Vorrichtung mehrere, parallel geschaltete Reaktoren aufweist, die mit Zu- und Ableitungen versehen sind, dadurch gekennzeichnet, daß die Reaktoren miniaturisiert sind, bei einem Volumen aus dem Bereich von $0,001 \text{ cm}^3$ bis 1 cm^3 .

Besondere Ausführungsformen bzw. Ausgestaltungen der Erfindung ergeben sich aus den jeweiligen Unteransprüchen. Es können auch einzelne oder mehrere der in den Ansprüchen genannten Einzelmerkmale jeweils für sich erfindungsgemäße Lösungen darstellen, und es sind auch die Merkmale innerhalb der Anspruchskategorien beliebig kombinierbar.

Eine besondere Ausführungsform des erfindungsgemäßen Verfahrens ist dadurch gekennzeichnet, daß man die Reaktionsedukte laufend den Reaktoren zuführt und die Reaktionsprodukte laufend aus den Reaktoren abführt. Die Batch-Fahrweise ist aber ebenfalls möglich.

Eine weitere besondere Ausführungsform ist dadurch gekennzeichnet, daß man Edukte verwendet, die mindestens teilweise mit Isotopen markiert sind, bevorzugt mit Deuterium (^2H) oder schweren Sauerstoff (^{18}O) oder schweren Kohlenstoff (^{13}C) oder Mischungen davon. Diese erzeugen charakteristische Spektralverschiebungen in Rotations-Schwingungsspektren, was neben der Reaktionswegemarkierung durch Eduktgemischvarianten zu neuen, interessanten Reaktionen bzw. Reaktionsprodukten führen kann und kleinere Nebenproduktanteile systematisch kontrastiert.

Es können auch einzelnen oder zu Gruppen zusammengefaßten Reaktoren unterschiedliche Eduktgemische zugeführt werden, um so mit den Methoden der kombinatorischen Chemie eventuell vorhandene Synergien zu erkennen oder zu entdecken. Die Edukt-, Reaktions- bzw. Produktgemische können mittels spektroskopischer Analyse, bevorzugt mittels Infrarotspektroskopie (IR), besonders bevorzugt mittels Fourier IR-Spektroskopie zu beliebigen Zeitpunkten des Reaktionsverlaufs nach Art und Menge der enthaltenen Substanzen analysiert werden. Andere spektroskopische Methoden wie Laser- oder UV-Spektroskopie sind zur Untersuchung ebenfalls geeignet. Das Verfahren kann bei unterschiedlichen Temperaturen und Drücken durchgeführt werden, bei Temperaturen aus dem Bereich von -50°C bis einschließlich 600°C , bevorzugt von Raumtemperatur bis 500°C , oder bei unterschiedlichen Drücken, bei Absolutdrücken von 10^{-3} bis 10^3 bar, bevorzugt von 10^{-2} bis 200 bar. Die gewonnenen Daten können dann einer umfassenden Parameter- und Datenanalyse zugeführt werden.

Die Erfindung ist weiter dadurch gekennzeichnet, daß die Reaktionen in Gegenwart eines Katalysators durchgeführt werden können und daß das Screening der katalytischen Aktivität (d. h. Produktnachweis) und Selektivität (Hauptproduktverteilung) von Katalysatormengen kleiner als 10 mg, bevorzugt kleiner als 1 mg, in einem Reaktor möglich ist.

In einer besonderen Ausgestaltungsform der erfindungsgemäßen Vorrichtung können in einem Block mehrere, voneinander getrennte, miniaturisierte Reaktoren angeordnet sein. Das Volumen dieser Reaktoren kann im Bereich von $0,001 \text{ cm}^3$ bis 1 cm^3 , bevorzugt von $0,01 \text{ cm}^3$ bis $0,5 \text{ cm}^3$, besonders bevorzugt von $0,05 \text{ cm}^3$ bis $0,2 \text{ cm}^3$ sein. In einer weiteren bevorzugten Ausgestaltungsform der erfindungsgemäßen Vorrichtung sind die Reaktoren als quadratisches oder rechteckiges Muster in einem Metallblock angeordnet, der quader- oder würfelförmig sein kann. Der Metallblock kann mit Heizblock- oder Kühlelementen versehen sein und kann in der Nähe eines jeden Reaktors mit einem Temperaturfühler ausgestattet sein. Dies ermöglicht eine kontrollierte und reproduzierbare Temperaturführung. Beispielsweise kann dadurch ein definierter Temperaturgradient über den Metallblock eingestellt werden. Die Reaktoren sind vorteilhafterweise in einer Ebene, die parallel zu einer Oberfläche des Quaders liegt, angeordnet. Die Zu- und Ableitungen der einzelnen Reaktoren liegen vorteilhafterweise zumindest teilweise senkrecht zu dieser Ebene. Sie können in dem Metallblock als durchgehende Bohrungen ausgeführt sein. Die Reaktoren können als Bohrungen ausgeführt sein. Die Zahl der

Reaktoren in einem Block kann größer sein als 20, bevorzugt größer als 40, besonders bevorzugt größer als 100, ganz besonders bevorzugt größer als 200. Mit diesen Reaktoren können unter definierten Reaktionsbedingungen kleine Menge potentieller Katalysatoren (im folgenden auch Proben genannt) gleichzeitig mit Edukt bzw. Eduktgemischen in flüssiger und/oder in gasförmiger Form diskontinuierlich oder kontinuierlich in Kontakt und zur Reaktion gebracht werden. Eine Automatisierung der erfindungsgemäßen Vorrichtung ist möglich, insbesondere kann das Beschicken der Reaktoren mit Katalysatoren automatisch, bevorzugt durch einen Laborroboter oder einen Pipettierer erfolgen.

In einer weiteren besonderen Ausgestaltungsform sind die miniaturisierten Reaktoren in dem Metallblock als 4 mm-Bohrungen ausgeführt und so angeordnet, daß sie durch 2,5-mm-Kapillarbohrungen mit unterschiedlichen Edukt- und Inertgasen beströmt werden können. Die Gase gelangen anschließend in einen Abstandshalter, vorzugsweise eine Distanzplatte, die auf den Metallblock aufgesetzt ist und in der sich die Bohrungen des Metallblocks fortsetzen. Die Anordnung aus Metallblock und Abstandshalter ist mit einer gängigen Küvettenbohrung versehen, in der die Gase spektroskopisch analysiert werden können. Dazu ist die Bohrung an beiden Enden mit einem transparenten Fenster verschlossen. Will man mit Infrarotspektroskopie analysieren, verwendet man bevorzugt Fenster aus 1-1-Silicium, NaCl, KBr, Ge, ZnSe oder KSR5. Zur Analyse wird ein kollimierter Analysestrahl, bei IR-Spektroskopie ein Infrarotstrahl, bevorzugt spiegelfrei aus einem Interferometer ausgekoppelt und durch Trockengas-gespülten Raum durch die Küvettenbohrung auf einen dahinter liegenden Detektor gelenkt. Die Küvettenbohrung kann beispielsweise 5 mm dick sein. Durch die Wahl eines geeigneten dicken Abstandhalters kann die Länge der Küvettenbohrung zwischen wenigen cm (1-10) und mehreren 10 cm (10-50) gewählt werden, je nach Reaktionsbedingungen und Reaktionstyp. Zur Aufnahme der Spektren kann der Analysestrahl mittels einer Ablenkvorrichtung nacheinander durch alle Küvettenbohrungen gelenkt werden. Es können aber auch mehrere Strahlen bzw. mehrere Analysatoren verwendet werden, so daß eine gleichzeitige Aufnahme von Spektren mit mehreren Reaktoren möglich ist. Es kann aber ebenso der Block mit den Reaktoren mittels Bewegungseinrichtungen, beispielsweise Schrittmotoren, so bewegt werden, daß alle Küvettenbohrungen nacheinander in den Strahlengang des Spektrometers gebracht werden. Als Werkstoffe für Block und Abstandshalter eignen sich vorzugsweise die gängigen, dem Fachmann geläufigen korrosionsbeständigen metallischen Werkstoffe, besonders Aluminium oder Stahl, vorzugsweise rost- und/oder säure- und/oder hochtemperaturbeständig.

Eine weitere Ausgestaltung der erfindungsgemäßen Vorrichtung, die sich besonders für die homogene Katalyse eignet, ist dadurch gekennzeichnet, daß bei mindestens einem Reaktor mit einem Volumen, das bevorzugt kleiner als 200 µl ist, ein ATR-Kristall (Attenuated Total Reflection Spectroscopy, bevorzugt konisch spitz, bevorzugt aus ZnSe oder aus KSR5 oder aus Diamant) den spektroskopischen Kontakt zum Reaktionsgemisch bei unterschiedlichen Lösungsmitteln und Reaktionsbedingungen und Drücken bis 200 bar ermöglicht. In diesem Fall wird der Analysestrahl auf den ATR-Kristall fokussiert.

Die Vorteile des erfindungsgemäßen Verfahrens und der erfindungsgemäßen Vorrichtung liegen im wesent-

chen darin, daß eine Vielzahl von Reaktionen unter praktisch identischen Bedingungen und mit vergleichsweise geringen Substanz- und Probenmengen schnell, kostengünstig und reproduzierbar durchgeführt und dabei gleichzeitig spektroskopisch untersucht werden kann. Sie bietet damit die Möglichkeit, die im Zusammenhang mit der kombinatorischen Chemie diskutierten Möglichkeiten (K. Burgess et al., Ang. Chem. 1996, 108, 2, 192, durch Bezugnahme mit in die Anmeldung integriert) für ein industrielles Katalysatorscreening einzusetzen. Durch die Wahl identischer Proben und unterschiedlicher sonstiger Reaktionsbedingungen wie Temperatur, Druck, Eduktzusammensetzung kann eine parallele Reaktionsoptimierung durchgeführt werden.

Zur Analyse der gewonnenen Daten wird vorteilhafterweise eine Datenmatrix dergestalt aufgestellt, daß alle wählbaren und dokumentierbaren Reaktionsbedingungen (Edukt-Partialdrücke, Eduktzusammensetzung, Temperatur, Durchfluß bzw. Durchflußrate, Gesamtdruck, Probenzusammensetzung, Probengitterparameter und alle Stützstellen der Spektren) nach Reaktionsbedingungen, d. h. je Reaktor, als Spalten der Matrix dargestellt werden. Diese Matrix kann einer Faktorenanalyse (E.R. Malinowski et al., Factor Analysis in Chemistry, Wiley, New York, 1980, durch Bezugnahme mit in die Anmeldung integriert) unterzogen werden, indem man die Kovarianzmatrix, die Eigenwerte, die abstrakten Eigenvektoren, die Loadings sowie die Koeffizienten der mehrdimensionalen Regression berechnet und bevorzugt als Dateien ausgibt. Es kann auch eine (Vor-)Normalisierung der Daten durch den Mittelwert "0" und Standardabweichungen "1" gewählt werden, wodurch Grundlinien- oder Absolutbetragseffekte vermieden werden können. Dies erlaubt die Vorhersage verschiedener Größen aus Eichdatensätzen (wie z. B. quantitative CO₂-Anteile bei verschiedenen Temperaturen), die Bestimmung der Abhängigkeit von Parametern in Spektralbereichen zur Optimierung der Analytik, die Generierung unterschiedlicher Distanzmatrizen aus den Ausgangsdaten (beispielsweise die Ähnlichkeit von Katalysatoren bezüglich der ausgewählten Größen und Eigenschaften) und das direkte Rückkoppeln der Katalysatorzusammensetzung auf einen Syntheselaborroboter, der einen Satz neuer Katalysatorproben mischt, und durch Sintern bzw. Kalzinieren auf einer Roboterstraße "selbständig" synthetisiert.

Im folgenden wird eine Ausführungsform des erfindungsgemäßen Verfahrens und eine Ausgestaltung der erfindungsgemäßen Vorrichtung anhand der Fig. 1 bis 2 näher erläutert, ohne daß dadurch beabsichtigt ist, die Erfindung in irgendeiner Weise zu beschränken.

Es zeigt

Fig. 1 eine schematische Darstellung der erfindungsgemäßen Vorrichtung 1 im Strahlengang eines spektroskopischen Analysators;

Fig. 2 einen einzelnen Reaktor 2 aus der erfindungsgemäßen Vorrichtung 1 in seitlicher Schnittdarstellung.

Eine Vorrichtung 1 zur Untersuchung von chemischen Reaktionen besteht im wesentlichen aus einer blockförmigen Anordnung 3 von miniaturisierten Reaktoren 2. Die blockförmige Anordnung 3 ist in der Weise ausgeführt, daß die Reaktoren 2 in einem quaderförmigen Metallblock 4, der eine Vorderseite 6 und eine Rückseite 7 aufweist, in der Form von Bohrungen eingearbeitet sind. Die Reaktoren 2 sind in die Vorderseite 6 des quaderförmigen Metallblocks 4 eingesenkt und in einem rechteckigem Muster angeordnet. Sie sind zum Zuführen der Edukte mit Bohrungen 5 verbunden. In die

Reaktoren 2 sind Katalysatoren 8 eingebracht. Auf die Vorderseite 6 ist als Abstandhalter eine Distanzplatte 9 aufgebracht, in der sich die Reaktoren 2 als Bohrungen fortsetzen. Von diesen führen weitere Bohrungen 10, die der Ableitung der Reaktionsprodukte dienen, zu einer Küvettenbohrung 11. Auf der Rückseite 7 ist als weiterer Abstandhalter eine Distanzplatte 12 angeordnet. Die Küvettenbohrung 11 setzt sich durch den Metallblock 4 hindurch bis durch die Distanzplatte 12 hindurch fort. Sie ist an den freien Oberflächen der Distanzplatten mit transparenten Fenstern 13 verschlossen und dient der Ableitung der Reaktionsprodukte und gleichzeitig als Raum für deren spektroskopische Analyse mittels eines IR-Strahls 14. Die Reaktionsprodukte werden, vom Reaktor 2 kommend, entsprechend den eingezeichneten Pfeilen durch die Bohrungen 10, 11 geleitet. Vom Ende der Küvettenbohrung 11 in der Distanzplatte 12 werden sie über Bohrungen 15 abgeleitet. In der Nähe der Reaktoren 2 sind Heizelemente 17 und Thermoelemente 18 in den Metallblock 4 eingebracht. Die blockförmige Anordnung 3 ist durch Schrittmotoren 16 in beide Raumrichtungen senkrecht zum IR-Strahl 14 bewegbar. Dadurch kann jede zu einem der Reaktoren 2 gehörige Küvettenbohrung 11 in den IR-Strahl bewegt werden. Die Analyse des IR-Strahls erfolgt durch Aufnahme des Interferogramms mittels Interferometer 20 und Detektor 19, die nahe den transparenten Fenstern 13 angeordnet sind.

Patentansprüche

1. Verfahren zur Untersuchung von chemischen Reaktionen, bei dem man die Reaktionen parallel in Reaktoren durchführt, dadurch gekennzeichnet, daß man die Reaktionen in miniaturisierten Reaktoren durchführt und das Reaktionsgemisch oder die Reaktionsprodukte während der Reaktionszeit analysiert.
2. Verfahren nach Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, daß man die Reaktionsprodukte laufend den Reaktoren zuführt und die Produkte laufend aus den Reaktoren abführt.
3. Verfahren nach Anspruch 1 oder 2, dadurch gekennzeichnet, daß man die Reaktionen bei unterschiedlichen Temperaturen durchführt, vorzugsweise bei Temperaturen aus dem Bereich von Raumtemperatur bis einschließlich 600°C oder bei unterschiedlichen Drücken, vorzugsweise bei Absolutdrücken von 10^{-3} bis 10^3 bar, besonders bevorzugt von 10^{-2} bis 200 bar.
4. Verfahren nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 3, dadurch gekennzeichnet, daß man die Reaktionen in Gegenwart eines Katalysators durchführt.
5. Verfahren nach Anspruch 4, dadurch gekennzeichnet, daß man pro Reaktor eine Katalysatormenge < 10 mg, bevorzugt < 1 mg verwendet.
6. Verfahren nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 5, dadurch gekennzeichnet, daß man das Reaktionsgemisch oder die Reaktionsprodukte spektroskopisch nach Art und Menge der Bestandteile analysiert, vorzugsweise mit IR-Spektroskopie.
7. Verfahren nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 6, dadurch gekennzeichnet, daß man die Reaktionen in mehr als 20, bevorzugt mehr als 40, besonders bevorzugt mehr als 100 Reaktoren durchführt.

8. Verfahren nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 6, dadurch gekennzeichnet, daß man Reaktionen der homogenen oder heterogenen Katalyse mit flüssigen oder gasförmigen Edukten oder Produkten untersucht.

9. Verfahren nach Anspruch 6, dadurch gekennzeichnet, daß man die spektroskopische Analyse an allen Reaktoren gleichzeitig durchführt indem man eine entsprechende Zahl von Analysatoren einsetzt, oder daß man die spektroskopische Analyse an den Reaktoren nacheinander durchführt, in dem man einen Analysestrahl, mittels einer Ablenkvorrichtung nacheinander auf die einzelnen Reaktoren richtet oder indem man die Reaktoren mittels einer Bewegungseinrichtung nacheinander in den Analysestrahl bringt.

10. Verfahren nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 9, dadurch gekennzeichnet, daß man Edukte verwendet, die mindestens teilweise mit Isotopen markiert sind, bevorzugt mit Deuterium oder schweren Sauerstoff oder schweren Kohlenstoff.

11. Verfahren nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 10, dadurch gekennzeichnet, daß einzelnen oder zu Gruppen zusammengefaßten Reaktoren unterschiedliche Eduktgemische zugeführt werden.

12. Vorrichtung, insbesondere zur Durchführung des Verfahrens gemäß Anspruch 1, wobei die Vorrichtung mehrere, parallel geschaltete Reaktoren aufweist, die mit Zu- und Ableitungen versehen sind, dadurch gekennzeichnet, daß die Reaktoren miniaturisiert sind, bei einem Volumen aus dem Bereich von $0,001 \text{ cm}^3$ bis 1 cm^3 .

13. Vorrichtung nach Anspruch 12, dadurch gekennzeichnet, daß die Reaktoren in der Form eines Blocks angeordnet sind, vorzugsweise rechteckig oder quadratisch.

14. Vorrichtung nach Anspruch 12 oder 13, dadurch gekennzeichnet, daß die Zuleitungen oder die Ableitungen oder die Reaktoren mindestens teilweise für Analysestrahlung, vorzugsweise für Infrarot-, Laser- oder UV-Licht transparent sind.

15. Vorrichtung nach einem oder mehreren der Ansprüche 12 bis 14, dadurch gekennzeichnet, daß die Reaktoren in einem quaderförmigen Metallblock angeordnet sind, der mit Heizelementen und/oder Temperaturmeßstellen ausgerüstet ist.

16. Vorrichtung nach einem oder mehreren der Ansprüche 12 bis 15, dadurch gekennzeichnet, daß die Vorrichtung mit Bewegungseinrichtungen versehen ist, vorzugsweise mit Schrittmotoren.

17. Vorrichtung nach einem oder mehreren der Ansprüche 12 bis 16, dadurch gekennzeichnet, daß die Vorrichtung mehr als 20, bevorzugt mehr als 40, besonders bevorzugt mehr als 100, ganz besonders bevorzugt mehr als 200 Reaktoren aufweist.

18. Vorrichtung nach einem oder mehreren der Ansprüche 12 bis 17, dadurch gekennzeichnet, daß mindestens ein Reaktor mit einem ATR-Kristall ausgerüstet ist, der einen spektroskopischen Kontakt zum Reaktionsgemisch ermöglicht.

19. Vorrichtung nach Anspruch 15, dadurch gekennzeichnet, daß die Reaktoren in einer Ebene parallel zu einer Oberfläche des Metallblockes angeordnet sind, daß die Zu- oder Ableitungen mindestens abschnittsweise senkrecht zu dieser Ebene gelegt sind, daß auf der Oberfläche eine Abstands-

halter angebracht ist, der Bohrungen aufweist, durch die die Reaktoren oder die Ableitungen verlängert sind, daß der Metallblock und die Abstandshalter Küvettenbohrungen aufweisen und daß auf der Abstandplatte für Analysenstrahlung transparente Fenster angebracht sind, die die Küvettenbohrungen gegen die Umgebung verschließen.

20. Vorrichtung nach einem oder mehreren der Ansprüche 12 bis 19, dadurch gekennzeichnet, daß die Reaktoren Katalysatoren enthalten, bevorzugt mit einem Gewicht kleiner als 10 mg pro Reaktor, besonders bevorzugt mit einem Gewicht kleiner als 1 mg pro Reaktor.

Hierzu 2 Seite(n) Zeichnungen

15

20

25

30

35

40

45

50

55

60

65



